

Литература

1. Henderson A. The Paraview Guide. [Electronic resource]. Kitware, Inc., 2004. Mode of access: <http://www.kitware.com>.
2. VisIt User's Manual version 1.5. [Electronic resource]. Lawrence Livermore National Laboratory, 2005. Mode of access: <http://www.llnl.gov/visit>.
3. Могиленских Д. В., Федоров В. В., Павлов И. В. Системы научной визуализации VIZI для графического представления результатов математического моделирования // Третий сибирский конгресс по прикладной индустриальной математике им. С. Л. Соболева (ИНПРИМ-98): Тез. докл. Ч. III. Новосибирск, 22–27 июня 1998 г. Новосибирск: Изд. Института математики СО РАН. С. 17–18.

МЕТОДИКА РАСЧЕТА НЕИЗОТЕРМИЧЕСКОЙ И ДВУХКОМПОНЕНТНОЙ ЗАДАЧ ФИЛЬТРАЦИИ

М. Н. Бардина, Ю. Н. Дерюгин, П. А. Машенькин

Российский федеральный ядерный центр –
Всероссийский НИИ экспериментальной физики, г. Саров

На сегодняшний день в связи с ухудшением качества подземных вод, разработкой сложных по подземному строению месторождений, в связи с необходимостью утилизации отработанных вредных веществ, специалисты, занимающиеся такого рода задачами, все чаще вынуждены обращаться к математическому моделированию движения флюидов в пористой среде. Для того чтобы ответить на вопрос о том, как движется вода в подземном пространстве, специалистам требуется провести подробный анализ земной породы, построить геологическую модель подземного пространства. Зачастую данная модель является очень подробной. Во времена отсутствия ЭВМ такие модели заменяли простейшими аналогами и оценивали решение задачи аналитически. Такой грубый подход имел право на существование. С появлением ЭВМ как у научного сообщества, так и у инженеров появился мощный инструмент для выполнения все более сложных задач. С течением времени модели, которые подвергались сильному упрощению, стали рассчитываться в полной постановке с учетом сложной неоднородной структуры залегающих на глубине пород. Кроме того, открылись новые горизонты исследований, связанные с учетом сложных нелинейных эффектов, таких как фильтрация вод переменной минерализации [1], перенос неорганических высокоминерализованных рассолов, например, попутные воды нефтяных месторождений либо тяжелые углеводородные жидкости, попадающие в подземные воды в результате утечек или аварий на поверхности земли или в действующих могильниках. Аналогичные проблемы характерны и для большинства приморских регионов, где интенсивный водоотбор приводит к интрузии морских вод.

Одной из самых простых среди перечисленных выше задач с математической точки зрения является расчет водоснабжения промышленных зон. Данные задачи зачастую описываются уравнениями в частных производных второго порядка параболического типа с постоянными коэффициентами в случае нестационарных задач и эллиптического типа в случае стационарных. Характеризуются такие задачи существенной неоднородностью порового пространства (пески сменяются глиной, галькой и т. д.) и характером залегания данных неоднородностей. Перепады по абсолютной проницаемости могут достигать нескольких порядков. Методы решения данных уравнений широко известны [2, 3]. Сложность в решении подобных задач может заключаться в качественном описании структуры подземного пространства и геометрии расчетной области. В задачах аэрогидродинамики сложности подобного рода решаются использованием неструктурированных сеток. Данная концепция была реализована авторами для задач подземной гидродинамики в программном комплексе «НИМФА».

Более сложными, с точки зрения вычислительной математики, являются задачи миграции. Наиболее простой из данного семейства задач является задача о пассивном (не влияющем на динамику потока) пятне загрязнения, которая описывается уравнением в частных производных гиперболического типа с постоянными коэффициентами. В литературе отмечено [4, 5], что обычные методы численного решения данного уравнения обладают существенными недостатками, такими как численная дисперсия или возникновение нефизичных осцилляций решения. Кроме того, зачастую перенос вещества в пористой среде может осуществляться не только конвективными потоками, но и посредством диффузии и дисперсии вещества в сложных по строению породах. При учете данных явлений, миграция загрязнителей описывается уже уравнениями в частных производных параболического типа, которые в литературе еще часто называют уравнениями конвекции-диффузии.

Задача о фильтрации флюидов с примесями, концентрации которых влияют на динамику фильтрационных потоков, является более сложной. К такого рода задачам можно отнести как фильтрацию со смешивающимися жидкостями, так и многофазную фильтрацию, где каждая фаза обладает своими термодинамическими функциями и течет со своей собственной скоростью фильтрации. Типичным для таких задач является неустойчивый струйный характер течения с образованием пальцев, описать которые с математической точки зрения весьма непросто. Данная задача описывается системой нелинейных уравнений в частных производных и может быть поставлена с учетом неизотермичности потока, где температура может иметь существенное влияние как на свойства жидкости, так и на свойства самой пористой породы.

Математическая модель

Задачи двухкомпонентной неизотермической фильтрации представляют большой интерес для гидрогеологов. В частности, одной компонентой может быть представлена питьевая вода, а другой – загрязнитель. При этом предполагается, что известно, как влияет изменение концентрации загрязнителя на поведение раствора «вода-загрязнитель». Данный случай можно рассматривать как модельный для задач захоронения РАО (радиоактивные отходы), в которых важно учитывать температурные эффекты. Кроме того, если предположить, что фильтрация изотермическая, то получится задача с учетом плотностной конвекции. А если предположить, что концентрация не влияет на динамику потока, получится задача о пассивном переносе пятна загрязнения. Таким образом, задача двухкомпонентной неизотермической фильтрации является общей, и математическая модель будет расписана именно для этого случая.

При неизотермической фильтрации часто полагается равенство температуры скелета пласта и насыщающей его жидкости [6, 7]. Такое предположение обосновывается практически мгновенным установлением теплового равновесия между твердой и жидкой фазами на фоне медленно протекающей фильтрации.

С учетом этого, запишем систему уравнений, описывающую двухкомпонентную неизотермическую фильтрацию:

$$\frac{\partial m\rho_f}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho_f \bar{V}) = Q, \quad (1)$$

$$\bar{V} = -\frac{K}{\mu}(\bar{V}P - \rho_f \bar{g}), \quad (2)$$

$$\frac{\partial m\rho_f C}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho_f \bar{V}C) - \operatorname{div}(m\rho_f \mathbf{D} \operatorname{grad} C) = Q_C, \quad (3)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left((m\rho_f C_{V_f} + (1-m)\rho_s C_{V_s}) T \right) + \nabla \cdot (\rho_f \bar{V} C_{\rho_f} T - \chi \nabla T) = Q_T, \quad (4)$$

где индексом s и f обозначены соответственно параметры для породы (solid) и раствора (fluid); $\chi = m\chi_f + (1-m)\chi_s$; \mathbf{K} , m – тензор абсолютной проницаемости и пористость породы; ρ – плотность;

\bar{V} – скорость фильтрации; \bar{g} – вектор ускорения свободного падения; C – концентрация (массовая доля) загрязнителя в растворе; \mathbf{D} – тензор суммарной дисперсии [8]

$$D_{ij} = D_{ij}^d + D_m \delta_{ij},$$

$$D_{ij}^d = (\delta_L - \delta_T) \frac{V_i V_j}{|V|} + \delta_T |V| \delta_{ij}, \quad \delta_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{для } i = j, \\ 0, & \text{для } i \neq j, \end{cases}$$

C_V , C_p – теплоемкость при постоянном объеме и давлении соответственно; χ – коэффициент теплопроводности; Q , Q_C , Q_T – массовый источник раствора, массовый источник загрязнителя, источник энерговыделения. При этом массовым источником раствора могут быть скважины, дождь, реки, озера, дренажи и т. д. Каждый из этих источников членов может содержать в себе загрязнитель с различной концентрацией, и, в случае работы как «источник» ($Q > 0$), результатом станет появление загрязнителя в моделируемой области. Результатом же работы источников члена как «сток» ($Q < 0$) будет выведение концентрации загрязнителя из области моделирования:

$$Q_C = QC, \quad C = \begin{cases} C_{\text{source}}, & \text{при } Q > 0, \\ C(x, y), & \text{при } Q < 0; \end{cases}$$

$$Q_T = Q\rho_f C_{p_f} T, \quad T = \begin{cases} T_{\text{source}}, & \text{при } Q > 0, \\ T(x, y), & \text{при } Q < 0. \end{cases}$$

Более детальный вывод уравнений (1)–(4) описан в [9].

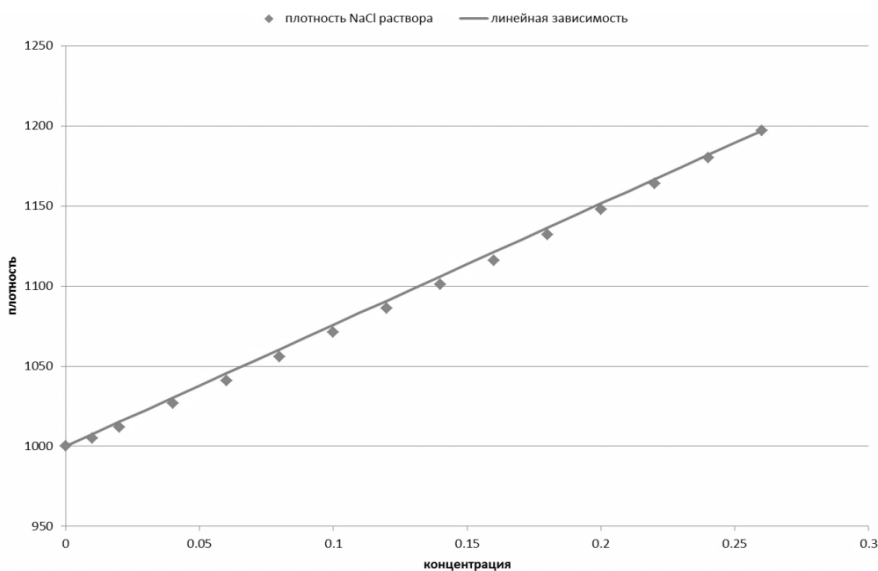


Рис. 1. Профиль плотности соленой воды в зависимости от концентрации соли

В качестве зависимости функции плотности от давления, температуры и концентрации без ограничения общности можно взять линейную функцию (рис. 1):

$$\rho_f = \rho_{f_0} + \rho_{f_0} \beta_f (P - P_0) - \rho_{f_0} \theta_f (T - T_0) + \rho_{f_0} \gamma_f (C - C_0), \quad \mu = \text{const}, \quad (5)$$

Отметим, что данная зависимость хорошо описывает слабо сжимаемые жидкости, которые не сильно изменяют свои свойства при изменении температуры и концентрации. Примером такой жидкости может быть соленая вода. При этом вязкость воды остается практически неизменной. Здесь и далее без ограничения общности будем рассматривать перенос именно соленой воды в качестве загрязнителя в пористой среде.

Кроме того, предполагается, что пористая среда является также слабо сжимаемой, и уравнения состояния характеристик пористой среды следующие:

$$m = m_0 + \beta_s (P - P_0), \quad \mathbf{K} = \mathbf{K}(x, y, z), \quad (6)$$

т. е. пористость – линейная функция от давления, а тензор абсолютной проницаемости не изменяется со временем и является постоянным значением в своей точке (x, y, z) .

О численной модели

Поставленная задача (1)–(4) с граничными условиями в виде фиксированного давления или напора, или потока жидкости через границу решается методом конечных объемов на произвольной неструктурированной сетке. На рис. 2 изображена ячейка с центром в точке P , имеющая набор ориентированных граней f с нормальными \overline{n}_f .

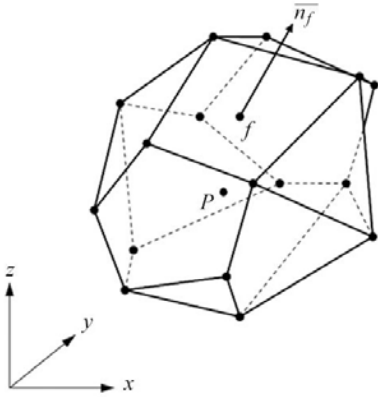


Рис. 2. Ячейка интегрирования

Подставив (2) в (1) и положив, что сила тяжести действует вдоль оси z , получим уравнение параболического типа для давления:

$$\frac{\partial m \rho_f}{\partial t} - \operatorname{div} \left(\rho_f \frac{\mathbf{K}}{\mu} (\nabla P + \rho_f g \nabla z) \right) = Q. \quad (7)$$

К уравнению (7) для полноты системы добавляются уравнения (3), (4) и уравнения состояния (5), (6). Система решается методом разделения по физическим процессам итерационно:

– на первом этапе решается уравнение для давления при фиксированной концентрации и температуре с предыдущего итерационного шага. В результате решения нам становятся известны массовые потоки через границы ячеек и значения давлений на новом итерационном шаге;

– на втором этапе рассчитывается перенос концентрации посредством конвекции и суммарной дисперсии при постоянном давлении и температуре. В результате решения нам становится известна концентрация на новом итерационном шаге;

– на третьем этапе, аналогично, считается поле температуры при постоянном поле давления и концентрации. В результате решения нам становится известна температура на новом итерационном шаге.

Данный цикл считается завершенным при выполнении критерия сходимости, в качестве которого можно взять максимальное отклонение плотности на итерациях меньшим заданного эpsilon.

Расчет поля давления

Проинтегрируем уравнение (7) по элементарной ячейке и представим его в разностном виде:

$$\frac{(m \rho_f)^{n+1} - (m \rho_f)^n}{\Delta t} \Delta V + L(P^{n+1}) = Q^{n+1}. \quad (8)$$

Здесь оператор $L(P)$ представляет собой аппроксимацию массового потока через все грани ячейки. Так как решение системы ищется итерационно, то, помимо P^n , C^n , T^n на известном временном слое и P^{n+1} , C^{n+1} , T^{n+1} на искомом временном слое, введем P^γ , C^γ , T^γ – величины на итерационных слоях. При входе в расчет системы (7), (3), (4) величины на итерационном слое равны величинам на слое n . Раскладывая величины $(n+1)$ слоя в ряд Тейлора в окрестности γ слоя и ограничиваясь линейным разложением, получим:

$$(m\rho_f)^{n+1} = (m\rho_f)^\gamma + \left(\frac{\partial(m\rho_f)}{\partial P}\right)^\gamma \Delta P + \left(\frac{\partial(m\rho_f)}{\partial T}\right)^\gamma \Delta T + \left(\frac{\partial(m\rho_f)}{\partial C}\right)^\gamma \Delta C, \quad (9)$$

где $\Delta P = P^{\gamma+1} - P^\gamma$, $\Delta T = T^{\gamma+1} - T^\gamma$, $\Delta C = C^{\gamma+1} - C^\gamma$.

Массовые потоки через грани ячеек ищутся методом отложенной коррекции. Оператор $L(P)$:

$$L(P^{n+1}) = \sum_{\text{face}=1}^{N_{\text{face}}} \Delta S_{\text{face}} \left(-\rho_f \frac{K}{\mu} (\nabla P + \rho_f g \nabla z) \bar{n} \right)_{\text{face}}^{n+1} = \sum_{\text{face}=1}^{N_{\text{face}}} \Lambda_{\text{face}},$$

$$\Lambda_{\text{face}}(P^{n+1}) = \Delta S_{\text{face}} \left(-\rho_f \frac{K}{\mu} (\nabla P + \rho_f g \nabla z) \bar{n} \right)_{\text{face}}^{n+1}.$$

Оператор Λ_{face} отвечает за массовый поток через грань face . Разложим оператор потока $\Lambda_{\text{face}}(P^{n+1})$ в ряд Тейлора до первых членов, как в (9):

$$\Lambda_{\text{face}}(P^{n+1}) = \Lambda_{\text{face}}(P^\gamma) + \left(\frac{\partial \Lambda_{\text{face}}}{\partial P}\right)^\gamma \Delta P,$$

$$\Lambda_{\text{face}}(P^\gamma) = \Delta S_{\text{face}} \left(-\rho_f^\gamma \frac{K}{\mu} (\nabla P^\gamma + \rho_f^\gamma g \nabla z) \bar{n} \right)_{\text{face}}, \quad (10)$$

$$\left(\frac{\partial \Lambda_{\text{face}}}{\partial P}\right)^\gamma \Delta P = -\rho_f^\gamma \frac{K}{\mu} ((\text{grad } \Delta P) \bar{n}) \Delta S_{\text{face}}. \quad (11)$$

Подставив (10), (11) в (8), получим уравнение в дельта-форме, которое и будет использовано в дальнейшем:

$$\frac{(m\rho_f)^\gamma + \left(\frac{\partial(m\rho_f)}{\partial P}\right)^\gamma \Delta P + \left(\frac{\partial(m\rho_f)}{\partial T}\right)^\gamma \Delta T + \left(\frac{\partial(m\rho_f)}{\partial C}\right)^\gamma \Delta C - (m\rho_f)^n}{\Delta t} + \left(\frac{\partial L}{\partial P}\right)^\gamma \Delta P + L(P)^\gamma = Q^{\gamma+1}, \quad (12)$$

где $\left(\frac{\partial L}{\partial P}\right)^\gamma \Delta P = \sum_{\text{face}=1}^{N_{\text{face}}} \left(\frac{\partial \Lambda_{\text{face}}}{\partial P}\right)^\gamma \Delta P$, $L(P)^\gamma = \sum_{\text{face}=1}^{N_{\text{face}}} \Lambda_{\text{face}}(P^\gamma)$.

Принимая приращение температуры и концентрации нулем, получим следующее разностное уравнение:

$$\frac{(m\rho_f)^\gamma + \left(\frac{\partial(m\rho_f)}{\partial P}\right)^\gamma \Delta P - (m\rho_f)^n}{\Delta t} + \left(\frac{\partial L}{\partial P}\right)^\gamma \Delta P + L(P)^\gamma = Q^{\gamma+1}. \quad (13)$$

Определим оператор потока от приращения давления $\left(\frac{\partial L}{\partial P}\right)^\gamma \Delta P$ и оператор потока от давления $L(P)^\gamma$. Рассмотрим схему на рис. 3 для определения потока:

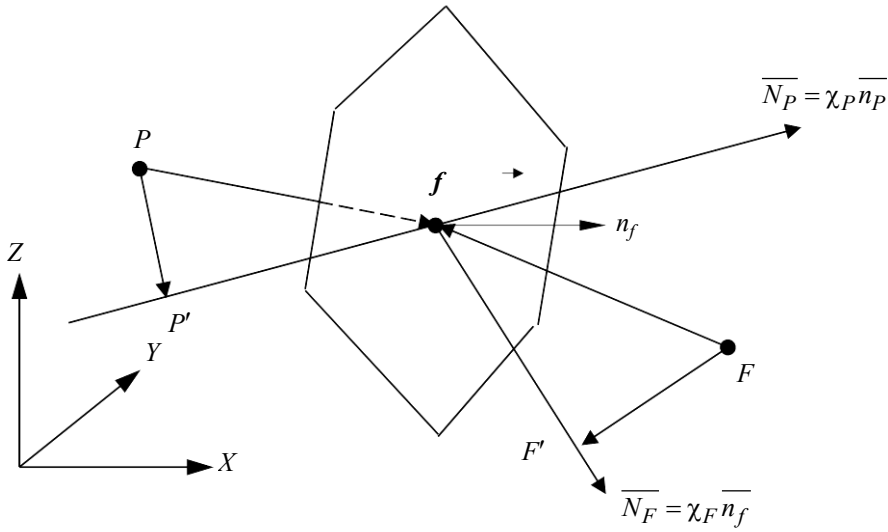


Рис. 3. Схема для определения потока через грань ячейки

На схеме изображена ориентированная грань f с нормалью \overline{n}_f , разделяющая ячейки P и F , для которых тензоры абсолютных проницаемостей, вообще говоря, различны. Для аппроксимации потока через грань (10) найдем конормали \overline{n}_P и \overline{n}_F , а также коэффициенты абсолютной проницаемости для грани со стороны ячейки P и F (K'_P и K'_F) по формулам (14):

$$\mathbf{K}_P \overline{n}_f = \overline{N}_P = K'_P \overline{n}_P, \quad \mathbf{K}_F \overline{n}_f = \overline{N}_F = K'_F \overline{n}_F, \quad (14)$$

где \overline{n}_P и \overline{n}_F — единичные векторы.

Проведем через центры P и F ячеек плоскости перпендикулярные векторам \overline{n}_P и \overline{n}_F . Определим (рис. 3) точки P' и F' пересечения этих плоскостей с линиями, проходящими через центр грани параллельно векторам \overline{n}_P и \overline{n}_F соответственно.

Считая, что давление в точках P' и F' известно, определим поток следующим образом:

$$\Lambda_{\text{face}}(P^\gamma) = (-1) \left[\left(\frac{\rho K}{\mu} \right)_{\text{face}} \frac{P'_F - P'_P}{|R_{P'_f}| + |R_{F'_f}|_F} \Delta S_{\text{face}} + \left(\frac{\rho K}{\mu} \right)_{\text{face}} \frac{Z'_F - Z'_P}{|R_{P'_f}| + |R_{F'_f}|} \rho_f g \Delta S_{\text{face}} \right]. \quad (15)$$

Абсолютная проницаемость на грани K_{face} вычисляется как среднее гармоническое значение:

$$K_{\text{face}} = \frac{K'_P K'_F \left(|R_{P_f}| + |R_{F_f}| \right)}{K'_P |R_{F_f}| + K'_F |R_{P_f}|}. \quad (16)$$

Плотность и вязкость на грани берутся как среднее арифметическое соседних ячеек. Давления в точках P' и F' определяются с помощью давлений в центрах ячеек P и F (17), (18) и градиентов давления в ячейках, найденных по формуле Грина – Гаусса (19):

$$P'_P = P_P + \left((\text{grad}P)_P \overline{R_{PP'}} \right), \quad (17)$$

$$P'_F = P_F + \left((\text{grad}P)_F \overline{R_{FF'}} \right), \quad (18)$$

$$(\text{grad}P)_P = \frac{\sum_{\text{face}=1}^{N_{\text{face}}} \left(P_{\text{face}} \overline{n_{\text{face}}} \Delta S_{\text{face}} \right)}{\Delta V_P}, \quad (19)$$

где $P_{\text{face}} = \frac{P_P |R_{F_f}| + P_F |R_{P_f}|}{|R_{P_f}| + |R_{F_f}|}$ определяется из линейной интерполяции по длине кривой.

Аппроксимация потока от приращения давления $\left(\frac{\partial \Lambda_{\text{face}}}{\partial P} \right)^\gamma \Delta P$ аналогична:

$$\left(\frac{\partial \Lambda_{\text{face}}}{\partial P} \right)^\gamma \Delta P = (-1) \left[\left(\frac{\rho K}{\mu} \right)_{\text{face}} \frac{\Delta P'_F - \Delta P'_P}{|R_{P_f}| + |R_{F_f}|} \Delta S_{\text{face}} \right]. \quad (20)$$

При этом в ходе итерации приращение давления будет устремляться к нулю, а градиент приращения давления еще быстрее окажется близким к нулевому вектору. Вследствие этого формулу (20) можно аппроксимировать следующим образом:

$$\left(\frac{\partial \Lambda_{\text{face}}}{\partial P} \right)^\gamma \Delta P = (-1) \left[\left(\frac{\rho K}{\mu} \right)_{\text{face}} \frac{\Delta P_F - \Delta P_P}{|R_{P_f}| + |R_{F_f}|} \Delta S_{\text{face}} \right]. \quad (21)$$

Формула (21) будет использоваться нами для выражения потока от приращения давления.

Таким образом, из уравнения в частных производных на основе выражений (13), (15), (21) получается СЛАУ, которая решается с помощью библиотеки PMLP [10]. В результате мы получаем массовые потоки через грани ячеек (15) и значения давлений в ячейках.

Расчет полей концентрации и температур

Уравнения (3), (4) относятся к уравнениям типа конвекции-диффузии и аппроксимируются аналогичным образом, поэтому в докладе будет изложена аппроксимация уравнения только для переноса концентрации. Аналогично расчетной схеме на неструктурированной сетке при поиске давления, для расчета концентрации будем использовать итерационную схему, основанную на дельта-форме уравнения. Представим разностное уравнение для концентрации с весом σ при аппроксимации потокового слагаемого:

$$\frac{(mpC)^{n+1} - (mpC)^n}{\Delta t} \Delta V + \sigma L(C^{n+1}) + (1 - \sigma)L(C^n) = Q_C. \quad (22)$$

Как видно, σ отвечает за то, какая схема будет использована ($\sigma = 1$ – неявная, $\sigma = 0$ – явная, $\sigma = 0,5$ – схема типа Кранка – Николсона). При этом операторы $L(C^{n+1})$ и $L(C^n)$ представляют аппроксимацию как диффузионного, так и конвективного потоков. Линеаризуем (22) и представим уравнение в дельта-форме:

$$(m\rho C)^{n+1} = (m\rho C)^\gamma + \left(\frac{\partial(m\rho C)}{\partial C}\right)^\gamma \Delta C + \left(\frac{\partial(m\rho C)}{\partial P}\right)^\gamma \Delta P + \left(\frac{\partial(m\rho C)}{\partial T}\right)^\gamma \Delta T.$$

Но так как на шаге концентрации предполагается, что давление и температура фиксированы, получим:

$$(m\rho C)^{n+1} = (m\rho C)^\gamma + \left(\frac{\partial(m\rho C)}{\partial C}\right)^\gamma \Delta C = (m\rho C)^\gamma + \left(m^\gamma \left(\rho + C \frac{\partial \rho}{\partial C}\right)^\gamma\right) \Delta C. \quad (23)$$

Поток $L(C^{n+1})$ определен следующим образом:

$$L(C^{n+1}) = \sum_{\text{face}=1}^{N_{\text{face}}} \left((\rho V C - m\rho D \text{grad} C)^{n+1} \bar{n} \right) \Delta S_{\text{face}} = \sum_{\text{face}=1}^{N_{\text{face}}} \Lambda_{\text{face}}^{n+1}. \quad (24)$$

Оператор Λ_{face} отвечает за массовый поток компоненты вещества через границу ячейки f . Λ_{face} можно разделить на конвективный и диффузионный операторы:

$$\Lambda_{\text{face}}^{n+1} = \Lambda_{\text{конв}}^{n+1} + \Lambda_{\text{дифф}}^{n+1}. \quad (25)$$

Линеаризация и аппроксимация диффузионного оператора аналогична аппроксимации диффузионного оператора уравнения для давления. Остановимся на конвективном потоке:

$$\Lambda_{\text{конв}}^{n+1} = \Lambda_{\text{конв}}^\gamma + \left(\frac{\partial \Lambda_{\text{конв}}}{\partial C}\right)^\gamma \Delta C, \quad (26)$$

$$\left(\frac{\partial \Lambda_{\text{конв}}}{\partial C}\right)^\gamma \Delta C = \Delta S_{\text{face}} (\rho V_n \Delta C)_{\text{face}}. \quad (27)$$

При этом величина $\Delta S_{\text{face}} (\rho V_n)_{\text{face}}$ уже известна после расчета поля давления как массовый поток вещества через границу f . ΔC_{face} в уравнении (27) определяется против потока, т. е.:

$$\Delta C_{\text{face}} = \begin{cases} \Delta C_P, & \text{если } \Delta S_{\text{face}} (\rho V_n)_{\text{face}} > 0, \\ \Delta C_F, & \text{если } \Delta S_{\text{face}} (\rho V_n)_{\text{face}} < 0. \end{cases} \quad (28)$$

Определяющим в данной методике является аппроксимация явных конвективных потоков $\Lambda_{\text{конв}}^\gamma$ и $\Lambda_{\text{конв}}^n$ через грань ячейки на итерационном и предыдущем слоях соответственно. Аппроксимация явных потоков определяется одинаково.

$$\Lambda_{\text{конв}}^\gamma = (\rho V_n \Delta S_{\text{face}}) C_{\text{face}}, \quad (29)$$

где $(\rho V_n \Delta S_{\text{face}})$ – вычисленный массовый поток вещества через грань. Ключевым является нахождение C_{face} на грани ячейки. Одним из методов восстановления концентрации на грани является экстраполяция из ячейки против потока с помощью градиента концентрации, вычисленного по формуле Грина – Гаусса аналогично (19), и ограничение этих значений для уменьшения осцилляций, возникающих в решении [11]. Без ограничения общности, положив, что поток направлен из ячейки P в ячейку F , получим:

$$C_{\text{face}} = C_P + \frac{\psi(r)}{2}(C_F - C_P), \quad (30)$$

где $\psi(r)$ – функция ограничитель; $r = \left[\frac{2((\text{grad}C)_P \overline{R_{PF}})}{C_F - C_P} - 1 \right]$.

Алгоритм вычислений

Расчет на $(n+1)$ -м временном слое (по вычисленным значениям P, C, T на n -м слое) начинается с инициализации итерационных величин $P^\gamma = P^n, T^\gamma = T^n, C^\gamma = C^n$. Далее по описанному выше алгоритму ищется поле давления на следующей итерации $P^{\gamma+1}$ и массовые потоки через грани (15). После нахождения давления переопределяем $P^\gamma = P^{\gamma+1}$, и во всех зависимых от давления величинах будем использовать новое найденное давление. После этого проводится расчет поля температуры, в результате чего получаем новое поле $T^{\gamma+1}$. После нахождения температуры переопределяем $T^\gamma = T^{\gamma+1}$, и во всех зависимых от температуры величинах будем использовать новую найденную температуру. Далее аналогично поступаем и с концентрацией. После окончания цикла по физическим процессам следует проверка на сходимость системы в целом (например, по малому изменению плотности). В случае, если критерий сходимости не достигнут, происходит обновление итерационных величин на слое γ с $(\gamma+1)$ -слоя найденного ранее.

Задача Шинкариола и Шварца

Задача хорошо описана в книге [8]. Ее особенностью является то, что данная задача имеет хорошую экспериментальную базу. На рис. 4 представлена схема данной задачи. Через левую границу поступает поток с заданной скоростью, в небольшой интервал которой подается вещество, увеличивающее плотность раствора.

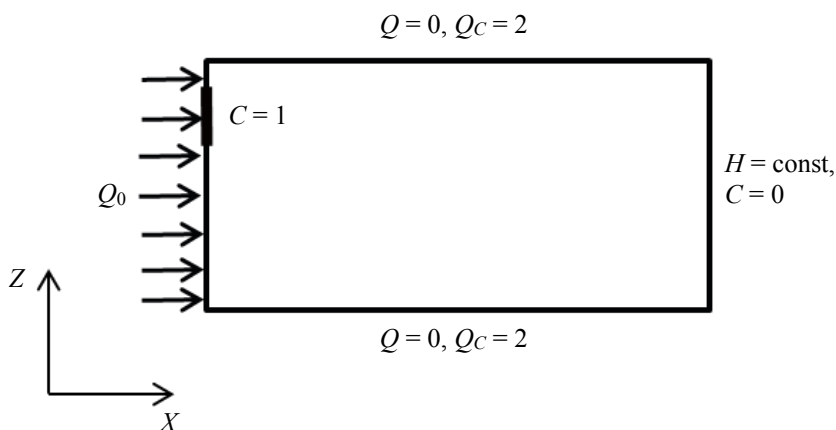


Рис. 4. Схема задачи Шинкариола и Шварца

В табл. 1 приведены параметры задачи Шинкариола и Шварца.

Таблица 1

Параметры задачи Шинкариола и Шварца

Название	Значение
Упругость	0 1/атм
Пористость	0,38
K_{xx}, K_{yy}, K_{zz}	57,1 мкм ²
Коэффициент продольной дисперсии	0 м
Коэффициент поперечной дисперсии	0 м
Вязкость воды	1 мПа · с
Плотность пресной воды	998,2 кг/м ³
Плотность соленой воды	1001,9 кг/м ³
Коэффициент растворимости	3,7 кг/м ³
Коэффициент диффузии	0,308016 м ² /сут

Данная задача решалась с различными вариантами. В табл. 2 приведены различия в вариантной постановке.

Таблица 2

Параметры многовариантных расчетов

Вариант	Описание			
	сеточное разбиение, $N_x \times N_z$	временной шаг, dt	схема	аппроксимация потока
Вариант 1	50×25	0,001	Кранка-Николсона	UpStream
Вариант 2	100×100	0,001	Кранка-Николсона	UpStream
Вариант 3	200×200	0,001	Кранка Николсона	UpStream
Вариант 4	400×400	0,001	Кранка Николсона	С ограничителем Венкатакришнана
Вариант 5	200×200	0,001	Кранка Николсона	С ограничителем Венкатакришнана
Вариант 6	200×200	0,001	Кранка Николсона	С ограничителем Ван Альбады

На рис. 5 приведены результаты расчетов задачи Шинкариола – Шварца:

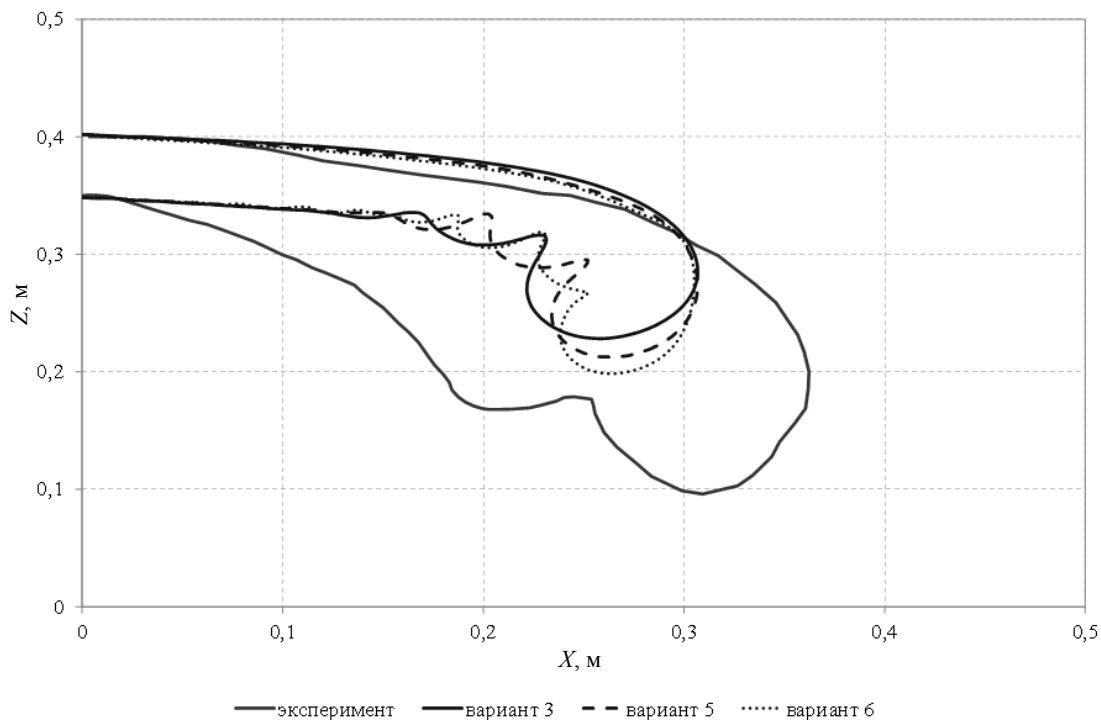


Рис. 5. Сравнение изолиний концентрации $C = 0,1$ для разных аппроксимаций потока, $t = 1$ сут

Численные результаты далеки от экспериментальных данных, но, несмотря на это, результаты коррелируют с результатами, полученными по программе TOUGH2 в [8] (рис. 6):

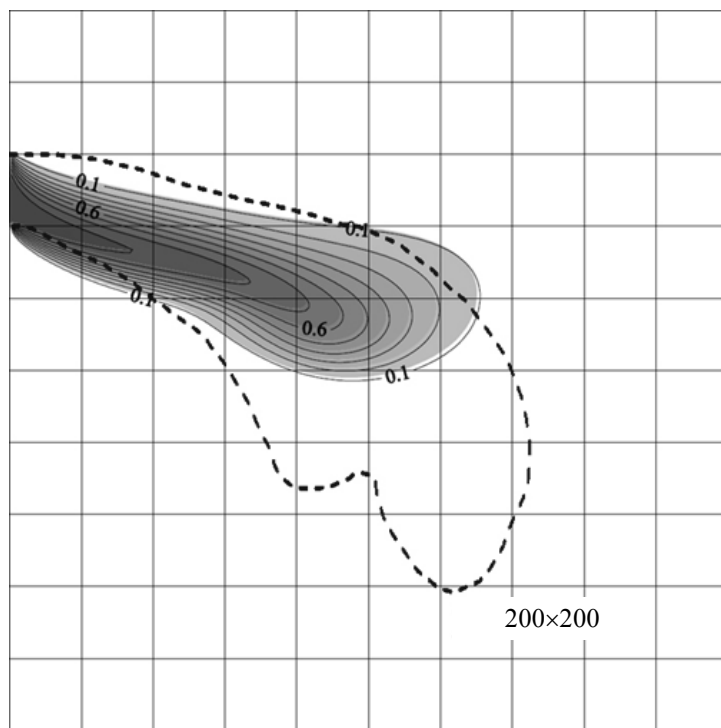


Рис. 6. Решение задачи Шинкариола – Шварца (поле концентрации, полученное по TOUGH2) — — — — — изолиния $C = 0,1$ (эксперимент)

Задача Horton – Rogers – Lapwood (HRL)

Данная задача взята из [12]. Схема задачи представлена на рис. 7:

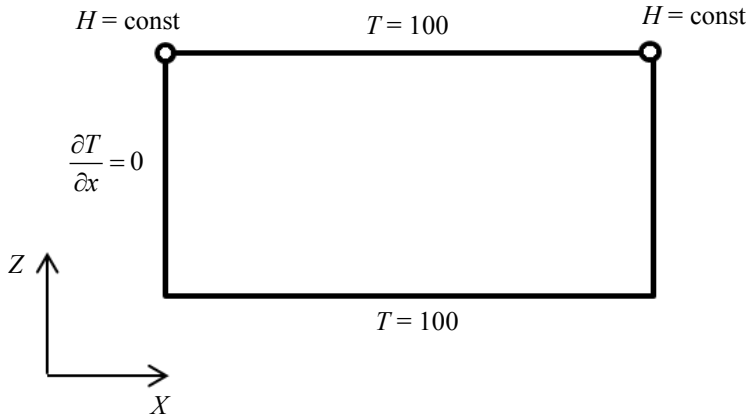


Рис. 7. Схема задачи HRL

Данная задача о термоконвекции основывается на работах таких авторов, как Rayleigh (1916), Horton и Rogers (1945), Lapwood (1948). Задача HRL состоит из бесконечного длинного пласта высотой h , полностью насыщенного жидкостью. Температура кровли и подошвы постоянны, причем температура подошвы больше температуры кровли. Было показано, что возможны два стационарных решения в зависимости от исходных данных. Первое решение характеризуется отсутствием конвекции, второе решение характеризуется ярко выделенными зонами с восходящим теплым и нисходящим холодным потоками. Данная задача решалась численно на программном комплексе НИМФА с целью проверки возможности кода моделировать термоконвекцию. Параметры задачи брались, как и в [12]. На рис. 8–10 изображены поле температуры из [12], поле температуры и вектора скорости, вычисленные по НИМФЕ, и линии тока, построенные по результатам НИМФЫ, соответственно.



Рис. 8. Поле температуры для задачи HRL из [12]

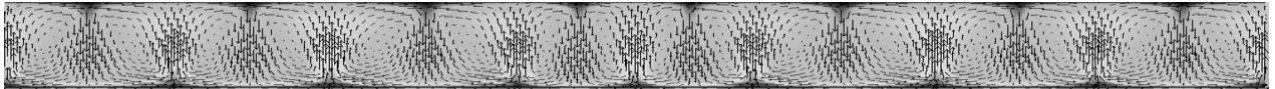


Рис. 9. Поле температуры и вектора скорости для задачи HRL, полученные по НИМФЕ

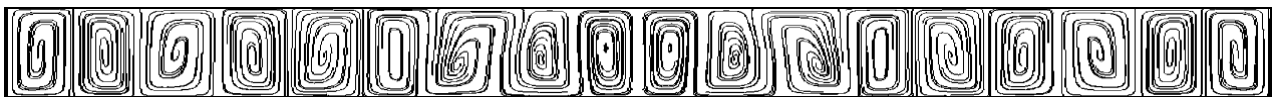


Рис. 10. Линии тока, построенные в Scientific view по данным, полученным из программы НИМФА по задаче HRL

Выводы

В данном докладе была представлена методика расчета неизотермической и двухкомпонентной фильтрации. Данный класс задач имеет большое практическое значение как при моделировании морской интрузии в прибрежной зоне, так и при моделировании возможных последствий утечек РАО из могильников. Представленная методика была разработана и реализована авторами в комплексе программ НИМФА, который разрабатывается в ИТФМ РФЯЦ-ВНИИЭФ. В отличие от наиболее распространенных аналогов, алгоритмы данной программы ориентированы на существенно неструктурированные сетки, что в ряде случаев позволяет упростить работу инженерам-гидрогеологам при подробном описании геологических объектов со сложной геометрией. Был предложен алгоритм решения системы дифференциальных уравнений подземной гидродинамики, основанный на дельта-форме с использованием итерационного процесса для учета совместного влияния полей давления температуры и концентрации друг на друга. Система решалась при помощи разбиения по физическим процессам, т.е. изначально решалась фильтрация, затем теплоперенос, затем миграция с учетом измененных насчитанных полей искомым величин. На сетке, близкой к равномерной, аппроксимация диффузионных операторов имеет второй порядок точности. Аппроксимация явных конвективных потоков с повышенным порядком точности основана на экстраполяции значения из ячейки против потока, с помощью градиента искомой функции и ограничении этих значений для уменьшения осцилляции решения. На задаче Шинкариола – Шварца были показаны преимущества такого подхода, т.е. при сетке с одинаковым разбиением метод с экстраполяцией дает решения более близкие к экспериментальным данным. Кроме этого, на задаче Шинкариола – Шварца и задаче HRL были показаны реальные возможности комплекса НИМФА и, в частности, данной методики моделировать задачи подобного типа.

Литература

1. Куваев А. А. Геофильтрационные модели потоков подземных вод переменной минерализации: дис. ... докт. г-м. наук. М., 2002
2. Петров И. Б., Лобанов А. И. Лекции по вычислительной математике: Учебное пособие. М.: Интернет-Университет Информационных Технологий; БИНОМ. Лаборатория знаний, 2006.
3. Самарский А. А. Введение в численные методы. С.-Пб.: Лань, 2005.
4. Leveque R. J. Finite-Volume Methods for Hyperbolic Problems. Cambridge: Cambridge University Press, 2004.
5. Trangenstein J. A. Numerical solution of hyperbolic partial differential equations. Cambridge: Cambridge University Press, 2007.
6. Шестаков В. М. Гидрогеодинамика. М.: КДУ, 2009.
7. Чекалюк Э. Б. Термодинамика нефтяного пласта. М.: Недра, 1965.
8. Rumynin V. G. Subsurface Solute Transport Models and Case Histories with Application to Radionuclide Migration. Springer, 2011.
9. Chen Z., Huan G., Ma Y. Computational Methods for Multiphase Flows in Porous Media. Philadelphia: SIAM, 2006.
10. Артемьев А. Ю., Бартенев Ю. Г., Басалов В. Г. и др. Реализованные методы решения разреженных линейных систем в библиотеке линейной алгебры // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2002. Вып. 2. С. 43–53.
11. Versteeg K. K., Malalasekera W. An Introduction to Computational Fluid Dynamics. Pearson, 2007.
12. Dausman A. M., Langevin C. D., Thorne D. T., Jr., Sukop M. C. Application of SEAWAT to Select Variable-Density and Viscosity Problems. U.S. Reston, Virginia: Geological Survey, 2010.